

VIDA JÓZSEF

## MODELLEK A MOLEKULAFIZIKÁBAN

**ABSTRACT:** *During teaching physics we can scrutinize complicated systems or processes by means of models. In this dissertation we scrutinize over an example how models are born. We would like to work out such molecule models for the analysis of the absorption spectra of diatomic gases which could be faithful images reflected by mirror for diatomic gas molecules. We will scrutinize how far classical mechanical models are applicable to quantum mechanical movements, where the limit is which must not be surpassed with forcing pictorialism in order to avoid hindering the creation of adequate models.*

A Természettudományi Lexikon szerint a fizikai modell "bonyolult fizikai rendszerek egyszerűsített, gyakorlatilag megvalósított, vagy szemléletesen elképzelt, matematikailag szabatosan leírható, idealizált mása, amely többé-kevésbé helyesen szemlélteti a vizsgált rendszer vagy folyamat fizikai sajátosságait".

A modell megalkotásához meg kell vizsgálnunk, hogy a kérdéses objektum mely más ismert rendszerhez hasonló, és akkor a rendszer megismert tulajdonságai alapján vonunk le következtetéseket az eredeti rendszer tulajdonságaira. Tehát a konkrét probléma megoldása helyett, valamely más feladat

ismert megoldását végezzük el (esetleg kis változtatásokat teszünk).

Érdemes a legegyszerűbb fizikai modellből kiindulni, olyanból, amelyben a kis jelentőségű tényezőket elhanyagoljuk és a lassan változó tényezőket állandónak tekintjük. Általában minél egyszerűbb a modell, annál könnyebben vizsgálható, viszont annál kevésbé pontos (annál pontatlanabbul tükrözi az eredeti rendszer sajátosságait).

Ha megtörtént a modell kiválasztása, akkor ki kell dolgoznunk egy olyan matematikai apparátust, amely a kísérletileg megfigyelhető eredményeket adja. A modelleknek ugyanis ezekről számot kell adni! Mivel a kísérleti eredmények általánosításával nyert tapasztalati törvények sem abszolút pontosak, így a modellre megállapított összefüggésektől sem várhatjuk el, hogy abszolút pontos törvényként szolgáljon a modellezettre.

Gyakran egy rendszer leírására több egyszerű modellt hozunk létre, hogy a rendszer egyes tulajdonságainak a modellek szerinti osztályozásával biztosítsuk a jelenségek egyszerű leírását. Ezek a modellek nemcsak különböznek egymástól, de legtöbbször egymásnak ellentmondóak is (pl.: atommag-modellek).

A következőkben vizsgáljuk meg egy konkrét példán - a probléma felvetődésétől a megoldásig - a modell születését. Ehhez válasszuk ki egy viszonylag egyszerűnek tűnő fizikai rendszert, a kétatomos molekulát!

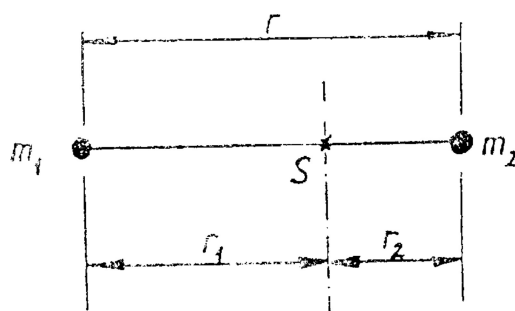
Kétatomos gázok abszorpciós szinképének vizsgálatánál azt tapasztalták, hogy a távoli és a közeli infravörös tartományban, a gáz minőségétől függő, jellegzetes szinképvonalak jelennek meg.

A színeképlet keletkezésének elmélete ekkor már ismert. Abszorpciós színeképeket úgy kapunk, hogy a gázon folytonos (minden hullámhosszat tartalmazó) infravörös fényt bocsátunk keresztül; a színeképben (spektrumban) ilyenkor sötét vonalak jelennek meg. Ezek az ún. elnyelési vagy abszorpciós spektrumvonalak és azt jelzik, hogy az infravörös sugárzás milyen hullámhosszakon (frekvenciákon) gerjesztette a gázt (ugyanis, ahol nincs elnyelés, ott a fény átmegy a gázon). Mivel a gáz - vizsgált tartományon belüli - hőmérsékletnövekedéssel járó gerjesztése nem ad spektrumvonalat, az atom elektronjainak ismert gerjesztéséhez pedig jóval nagyobb energiák kellenek, arra lehetett következtetni, hogy a gázmolekulák valamilyen belső mozgásállapotváltozásához szükséges a besugárzáskor elnyelt energia.

Ismerve a kétatomos molekula konfigurációját (térbeli geometriai felépítését), a molekula belső mozgását megfeleltetjük a makroszkópikus forgásnak és rezgésnek és azt vizsgáljuk, hogy az elnyelt infravörös fény hatására a forgási és rezgési állapotváltozások létrejöhetnek-e? De közben ne feledjük, hogy a valóságos mikrofizikai jelenség helyett egy tökéletlen és furcsa makrovilágbeli elemekből épült modellt szemlélünk, azaz az egzakt elmélet megállapításait nem szabad figyelmen kívül hagynunk. Kiderítjük, milyen fajta színeképet várhatunk a kvantummechanika alapján egy ilyen forgó vagy rezgő rendszer esetén, és összehasonlítjuk azt az észlelt infravörös színeképpel.

Le kell tehát "írni" a modell működését, és a modell mozgásával kapcsolatos számítási eredményeket össze kell vetni a tapasztalattal.

A forgó molekula egyszerű mechanikai modellje a súlyzómodell (1. ábra.).



1. ábra

A két pontszerűnek tekintett atom egymástól ( $r$ ) távolságban a súlytalan, merev rúd két végén helyezkedik el. (Itt elhanyagoltuk az atomok kiterjedését és azt, hogy az atomok a valóságban nem mereven kapcsolódnak egymáshoz.) A térben a molekulamodell a tömegközépponton átmenő és az összekötőrúdra merőleges szabadtengely körül foroghat adott szögsebességgel.

Következő feladat a modell mozgásával kapcsolatos összefüggések összegyűjtése, a számítások elvégzése.

A forgási energiát kifejezhetjük a tehetetlenségi nyomaték ( $I$ ) és a perdület ( $N$ ) (impulzusmomentum) segítségével:

$$E_f = \frac{N^2}{2I} \quad (1)$$

A  $\nu_f$  forgási frekvenciát a szögsebesség az alábbiak szerint határozza meg:

$$\nu_f = \frac{\omega}{2\pi} \quad (2)$$

A tömegközépponton átmenő, adott irányú tengelyre vonatkozó tehetetlenségi nyomatékat pedig az

$$I = m_1 r_1^2 + m_2 r_2^2 \quad (3)$$

képlet alapján számíthatjuk.



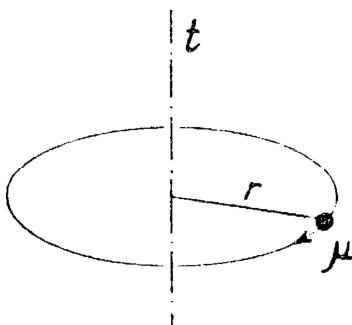
Ez átalakítva a következő alakú:

$$I = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} r^2 \quad (4)$$

Látható, hogy (I) megegyezik egy

$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \quad (5)$$

tömegű tömegpont tehetetlenségi nyomatékával, ha az a forgástengelytől (r) távolságra helyezkedik el. A  $\mu$ -t a molekula redukált tömegének nevezzük. A szemléletes súlyzómodell helyett találtunk egy kevésbé szemléletes, (az elképzelt molekulához nem annyira hasonló) de egyszerűbb, könnyebben kezelhető modellt, amelynek neve: merev rotátor. (2. ábra).



2. ábra.

A merev rúd a  $\mu$  tömegponttal a (t) tengely körül forgó mozgást végez. A (t) tengelyre vonatkozó perdület a klasszikus mechanikában csak a szögsebességtől függ. így, mivel a szögsebessége folyamatosan változhat, a modell nem működőképes, azaz a tapasztalati eredményeket nem szolgáltatja. Nevezetesen: tetszőleges lehet forgási energiája, s ez a vonalas színekép létrejöttével ellentétben van.

Az előrehaladás érdekében el kell szakadni a megfogható valóságtól. A kvantummechanikai számításokat hívjuk segítségül, amelyek szerint a molekula impulzusmomentuma diszkrét (csak adott értékeket vehet fel). Ezt az ismert Schrödinger-egyenlet megoldásával kapjuk:

$$N = \frac{h}{2\pi} \sqrt{J(J+1)} \quad (6)$$

A (J) rotációs kvantumszám értéke 0,1,2,..... stb. egész szám lehet, amivel a lehetséges forgási energiák az

$$E_f = \frac{h^2}{8\pi^2 I} J(J+1) \quad (7)$$

képlet szerint határozhatók meg, ahol (h) a Planck-állandó.

Ennek alapján a rotátor csak adott szögsebességekkel foroghat, mely szögsebességek meghatározzák forgási energiaértékeit. Egyik energiaszintről egy másikba pedig csak úgy juthat el a rotátor, ha a két szint közti energiakülönbséget egy adagban veszi fel, illetve adja le (az átmenet kvantált). Az így működő merev rotátorra elvégzett számítások igen közeli eredményeket adnak a kísérleti tapasztalatokkal.

A rotációs molekulaszínekép a távoli infravörös tartományban (25-500  $\mu\text{m}$ ) jelentkezik. A színeképvonalak vizsgálata fontos molekulafizikai állandók meghatározását teszi lehetővé. Így többek között a mérési adatok és a (7) képlet segítségével a molekula tehetetlenségi momentumát, abból pedig az atomok közötti távolságot (magtávolság) lehet kiszámítani.

A kétatomos molekulák másik belső mozgását a rezgőmozgással (vibráció) helyettesítjük (modellezzük). Ezt úgy kell elképzelni, hogy a molekulában az atomok egyensúlyi helyzetük körül végeznek rezgéseket (a két atom vagy közelit

vagy távolodik egymáshoz képest, miközben a molekula tömegközéppontja helyben marad). A molekula mechanikai kivitelezése: az atomokat jelképező két tömegpont közé egy rúgót helyezünk. Rezgéseket végeztetve az így elkészített rendszerrel, az kis amplitudók esetén - mikoris a kitérés az időnek szinuszos függvénye - harmonikus rezgőmozgást végez. A két tömegpont fenti mozgása redukálható egyetlen tömegpont egyensúlyi helyzete körüli harmonikus rezgésére, ha bevezetjük a forgómozgásnál már megismert (5) redukált tömeget. Az így előállt modell neve: harmonikus oszcillátor. Az oszcillátor frekvenciáját a mechanikából jól ismert képlet segítségével számíthatjuk:

$$\nu_r = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{D}{\mu}} \quad (8)$$

ahol (D) az erőállandó, ( $\mu$ ) a redukált tömeg. Érdeemes megjegyezni: amíg a rotátornál a klasszikus mechanikai elmélet szerint minden rotációs frekvenciaérték előfordulhatott (2), itt még a klasszikus elmélet is csupán egyetlen frekvenciát enged meg, amelynek nagysága a két tömegpont tömegétől és a rúgó erőállandójától függ. A valóságban - a kvantummechanikai számításokkal egybeesően - az oszcillátor energiája diszkrét értékeket vehet fel, amelyeket az alábbi összefüggés alapján számíthatunk:

$$E_r = h \nu_r \left( v + \frac{1}{2} \right) \quad (9)$$

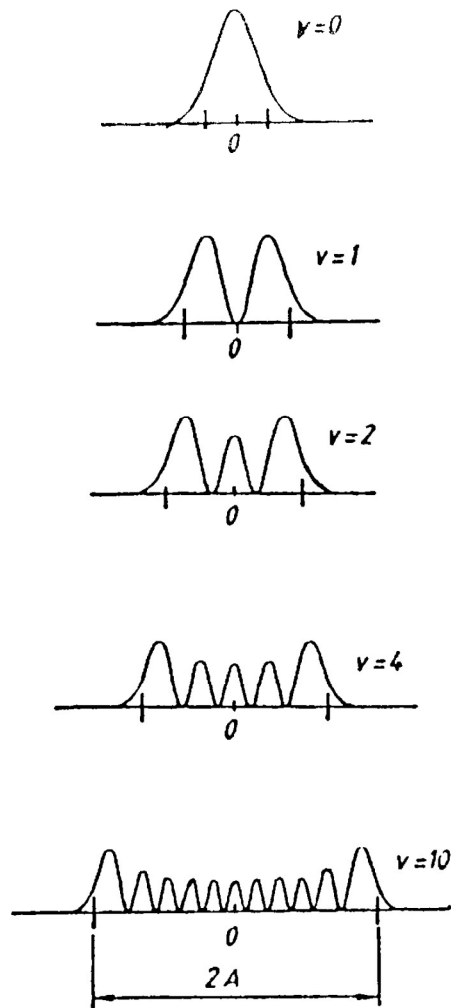
Itt ( $v$ ) a rezgési kvantumszám, amelynek értéke 0,1,2,3...stb. egész szám lehet, a ( $\nu_r$ ) pedig a (8) alatt meghatározott klasszikus frekvencia.

A vibrációs molekulaszínekép a közeli infravörös tartományban (2-25  $\mu\text{m}$ ) jelentkezik. Elemzésével, ha ismerjük az alkotó atomok tömegeit, meghatározható a molekula erőállandója.

A merev rotátorral és harmonikus oszcillátorral történő számítások jól megközelítették a mérési eredményeket, de nem egyeztek meg azokkal teljesen. Ahhoz, hogy pontosabb értékeket kapjunk tovább kell fejlesztenünk modelljeinket (vagy más modellek létrehozásával próbálkozunk). Így jött létre a nem merev rotátor és az anharmonikus oszcillátor, amelyek felépítésükben és működésükben még a klasszikus mechanikai elvekre épülnek és nagy pontossággal "adják" a tapasztalati eredményeket (ezek részletes tárgyalására itt nem térünk ki).

A molekula kvantummechanikai vizsgálatát a rotátor és az oszcillátor már nem teszi lehetővé. Az egész klasszikus fizika összes fogalma a gyakorlati életben is szerepel, így azok megértéséhez segítségül jönnek az alapvető szemléletbeli képek. Ebbe a képbe nem illeszthető be a kvantummechanikai mozgásforma, mert a megértést nem segíthetjük érzéki benyomásokra való hivatkozással.

A kvantummechanikai "rezgés" esetén a tömegpont nem a fordulópont környezetében mozog a "leglassabban", azaz nem ott található meg a legvalószínűbben, mint ahogyan az a klasszikus esetben érvényesült. Nagy kvantumszámok esetén is csak közelít a klasszikus mechanikai modellhez.

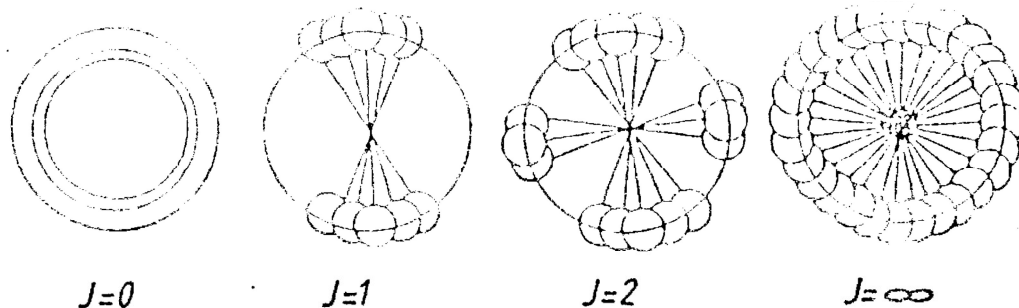


3. ábra

(3. ábra: az abszcisszán a magtávolságnak az egyensúlyi helyzettől (0) való eltérését, az ordinátán a rezgő részecske előfordulásának valószínűségét adtuk meg különböző rezgési kvantumállapotban;  $A$ -val az amplitudót jelöltük.)

A kvantummechanikai "forgó" mozgás is lényegesen különbözik a klasszikustól: a rotációs frekvenciának nincsen egészen meghatározott jelentése. A  $J = 0$  forgásmentes állapot azt jelenti, hogy a részecske egyenlő valószínűséggel található a gömbi pálya minden pontján. Nullától eltérő kvantumszámú

állapotok esetében jellemző mintázatot alakítanak ki a duzzadóhelyek (ahol "lassu" a forgás) és ritkulások (ahol a keringés "gyors") (4. ábra).



4. ábra

Nagyon magas kvantumszámok esetén közelít csak a jelenség a klasszikus mechanikai rotátor mozgásához.

Miért mondjuk mégis, hogy a "forgó molekula", a "rezgő molekula", ha az igazi mozgás teljesen más jellegű? Mert ha egy valóságos atomtömegekkel rendelkező, meghatározott erőállandójú rugóval molekulaméretű objektumot tudnánk készíteni, azt forgásra és rezgésre készítenénk, úgy forgási és rezgési energiái egybeesnének a molekula-színképből meghatározott rotációs, vibrációs energiákkal. Ez a kép hétköznapi szemléletünk alkotása, amely csak a megszokottat tudja elképzelni, a szokatlant nem.

A molekula kvantummechanikai vizsgálatához újszerű megközelítésre van szükség, mert a mikrovilágról nem tudunk képet festeni, azaz nem készíthetünk olyan modellt, amelyik érzékszervi tapasztalásunk számára hozzáférhető volna.

A mikrofizika törvényeinek megértését éppen a képszerűség erőszakolása nehezíti, mivel nagyfokú képzelőerőt igényel az, hogy hogyan viselkedik egy mikro-objektum, ami semmi addig látotthoz nem hasonlítható. Pedig a mikrovilág

semmivel sem abszurdabb a környező világnál, csupán csak másabb. Ennek a másabb világnak a megismeréséhez már a kvantummechanikai modelleken át vezet az út.

#### AJÁNLOTT IRODALOM

- [1] Fényes Imre: A fizika eredete  
Kossuth Könyvkiadó 1980.
- [2] Gitterman, M., Halpern, V.: Fizikai problémák kvalitatív elemzése  
Műszaki Könyvkiadó, Bp. 1985.
- [3] Herzberg, G.: Molekula-színeképek és molekulaszervezetek I  
Akadémiai Kiadó, Bp. 1956.
- [4] Károlyházy Frigyes: Igaz varázslat  
Gondolat, Bp. 1976.
- [5] Liszi I., Ruff I., Schiller R., Varsányi Gy.: Bevezetés a fizikai kémiába  
Műszaki Könyvkiadó, Bp. 1983.
- [6] Szűcs Ervin: Technika és rendszer (egyetemi jegyzet)  
Tankönyvkiadó, Bp. 1985.

